

пути поступления хлорированных углеводов в Верх-Исетский пруд и их дальнейшее поведение в нижнем течении.

Для более правильного понимания «истории» той или иной воды необходимо существенно расширять количество разнообразных объектов анализа.

При расшифровке масс-спектров электронного удара хроматографически не разрешенных компонентов предложено использование нейронной сети, обученной на библиотечных данных. Алгоритм реализован с использованием языка R.

ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА СООСАЖДЕНИЯ МЫШЬЯКА И СУРЬМЫ ПРИ ОТДЕЛЕНИИ МАКРОКОМПОНЕНТОВ СТАЛИ И ПРЕЦИЗИОННЫХ СПЛАВОВ В ВИДЕ Na_3FeF_6 , Na_3CrF_6

Окунева Т.Г.⁽¹⁾, Майорова А.В.⁽²⁾, Пупышев А.А.⁽¹⁾

⁽¹⁾ Уральский федеральный университет

620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

⁽²⁾ Институт металлургии УрО РАН

620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 101

В металлах высокой чистоты и сплавах ответственного назначения строго регламентируется содержание сурьмы и мышьяка на очень низком уровне. Разработка простого и экспрессного метода одновременного отделения микропримесей от металлов, образующих основу сталей и прецизионных сплавов (железа, хрома, никеля и т.д.), представляет собой актуальную задачу, поскольку позволит проводить беспрепятственное определение аналитов практически любыми инструментальными методами. Отделению As, Sb могло бы помочь связывание компонентов основы Fe, Cr, Ni в комплексные труднорастворимые соединения, например, со фторид-ионами, при их осаждении из кислотных растворов фторидами щелочных металлов. Установлено, что в результате осаждения макрокомпонентов стали и прецизионных сплавов образуются кристаллические осадки со структурой Me_3FeF_6 , Me_3CrF_6 и, в некоторых случаях, удается успешно отделить аналиты от мешающего влияния основы пробы. Но иногда микрокомпоненты после проведения осаждения макрокомпонентов в анализируемом растворе не обнаруживаются или наблюдается значительное снижение их концентраций (эффект соосаждения).

Для описания процесса соосаждения арсенат- и антимонат- ионов на осадках макрокомпонентов были использованы широко применяемые уравнения изотерм адсорбции: Ленгмюра, Фрейндлиха, Дубинина-

Радушкевича, БЭТ. Обнаружено, что для описания соосаждения анализов лучше всего подходит модель Дубинина-Радушкевича (максимальный коэффициент аппроксимации). Поэтому процесс соосаждения As и Sb представляется как процесс объемного заполнения микропор осадка, содержащего макроколичества Fe, Cr, Ni. Модель Дубинина-Радушкевича указывает на природу адсорбции и может быть использована для расчета средней свободной энергии адсорбции (E). Рассчитанные значения E для As и Sb составляют 9.62, 9.71 кДж/моль соответственно. В этом случае, процесс протекает по ионообменному механизму и закрепление арсенат- и антимонат-ионов имеет химическую, а не физическую природу. Оптимизация процедуры пробоподготовки (разбавление, перемешивание, увеличение температуры осаждения), которая могла иметь значение при физической адсорбции (действии сил Ван-дер-Ваальса), в рассматриваемой системе не приведет к значительному положительному эффекту. В случае действия химического механизма адсорбции необходимо работать в более «жестких условиях» для предотвращения эффекта перенасыщения раствора и ингибировать процесс образования большого количества зародышей кристаллов во время формирования осадка, тем самым укрупняя его и уменьшая количество микропор. Очень эффективным способом понижения перенасыщения раствора является связывание Fe, Cr и Ni в комплексные соединения средней прочности. В нашем случае таким комплексообразователем может выступать фтороводородная кислота. Целью наших дальнейших исследований является изучение влияния HF на процесс соосаждения As, Sb при их отделении от Fe, Cr, Ni.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИМЕТ УрО РАН № 0396-2015-0087.

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОСТАВА КРЕМНИЙОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Павлова Я.Е., Данилов Д.А., Данилова Д.А., Окилов Б.Р.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Кремнийорганические соединения и материалы, получаемые на их основе, представляют большой интерес для развития и совершенствования процессов в важнейших областях техники и народного хозяйства. На основе таких соединений выпускаются покрытия, обладающие рядом полезных свойств таких как: термостойкость, влагостойкость, малое изменение физических характеристик в большом диапазоне температур. На сегодняшний день кремнийорганические соединения очень